

DIN EN ISO 23131



ICS 17.020

Entwurf

Einsprüche bis 2022-09-01
Vorgesehen als Ersatz für
DIN 50989-1:2018-03

**Ellipsometrie –
Grundlagen (ISO 23131:2021);
Deutsche und Englische Fassung prEN ISO 23131:2022**

Ellipsometry –
Principles (ISO 23131:2021);
German and English version prEN ISO 23131:2022

Ellipsométrie –
Principes (ISO 23131:2021);
Version allemande et anglaise prEN ISO 23131:2022

Anwendungswarnvermerk

Dieser Norm-Entwurf mit Erscheinungsdatum 2022-07-01 wird der Öffentlichkeit zur Prüfung und Stellungnahme vorgelegt.

Weil die beabsichtigte Norm von der vorliegenden Fassung abweichen kann, ist die Anwendung dieses Entwurfs besonders zu vereinbaren.

Stellungnahmen werden erbeten

- vorzugsweise online im Norm-Entwurfs-Portal von DIN unter www.din.de/go/entwuerfe bzw. für Norm-Entwürfe der DKE auch im Norm-Entwurfs-Portal der DKE unter www.entwuerfe.normenbibliothek.de, sofern dort wiedergegeben;
- oder als Datei per E-Mail an nmp@din.de möglichst in Form einer Tabelle. Die Vorlage dieser Tabelle kann im Internet unter www.din.de/go/stellungnahmen-norm-entwuerfe oder für Stellungnahmen zu Norm-Entwürfen der DKE unter www.dke.de/stellungnahme abgerufen werden;
- oder in Papierform an den DIN-Normenausschuss Materialprüfung (NMP), 10772 Berlin oder Am DIN-Platz, Burggrafenstr. 6, 10787 Berlin.

Die Empfänger dieses Norm-Entwurfs werden gebeten, mit ihren Kommentaren jegliche relevanten Patentrechte, die sie kennen, mitzuteilen und unterstützende Dokumentationen zur Verfügung zu stellen.

Gesamtumfang 45 Seiten

DIN-Normenausschuss Materialprüfung (NMP)

Nationales Vorwort

Der Text von ISO 23131:2021 wurde vom Technischen Komitee ISO/TC 107 „Metallic and other inorganic coatings“ der Internationalen Organisation für Normung (ISO) erarbeitet und als prEN ISO 23131:2022 durch das Technische Komitee CEN/TC 262 „Metallische und andere anorganische Überzüge, einschließlich des Korrosionsschutzes und der Korrosionsprüfung von Metallen und Legierungen“ übernommen, dessen Sekretariat von BSI (Vereinigtes Königreich) gehalten wird.

Das zuständige nationale Normungsgremium ist der Arbeitsausschuss NA 062-01-61 AA „Mess- und Prüfverfahren für Schichten und Schichtsysteme“ im DIN-Normenausschuss Materialprüfung (NMP).

Um Zweifelsfälle in der Übersetzung auszuschließen, ist die englische Originalfassung beigelegt. Die Nutzungsbedingungen für den deutschen Text des Norm-Entwurfes gelten gleichermaßen auch für den englischen Text.

Für die in diesem Dokument zitierten Dokumente wird im Folgenden auf die entsprechenden deutschen Dokumente hingewiesen:

ISO/IEC 17025 siehe DIN EN ISO/IEC 17025

Aktuelle Informationen zu diesem Dokument können über die Internetseiten von DIN (www.din.de) durch eine Suche nach der Dokumentennummer aufgerufen werden.

Änderungen

Gegenüber DIN 50989-1:2018-03 wurden folgende Änderungen vorgenommen:

- a) Übernahme als DIN EN ISO 23131;
- b) redaktionelle Anpassung an DIN 820-2.

Nationaler Anhang NA
(informativ)

Literaturhinweise

DIN EN ISO/IEC 17025, *Allgemeine Anforderungen an die Kompetenz von Prüf- und Kalibrierlaboratorien*
(ISO/IEC 17025:2017)

– *Entwurf* –

E DIN EN ISO 23131:2022-08

– Leerseite –

Ellipsometrie – Grundlagen (ISO 23131:2021)

Ellipsometry – Principles (ISO 23131:2021)

Ellipsométrie – Principes (ISO 23131:2021)

Inhalt

	Seite
Europäisches Vorwort	4
Vorwort	5
Einleitung	6
1 Anwendungsbereich	7
2 Normative Verweisungen	7
3 Begriffe, Symbole und Abkürzungen	7
3.1 Begriffe	7
3.2 Symbole und Abkürzungen	7
4 Experimentelle Randbedingungen mit Bezug zur Probe	8
5 Experimentelle Randbedingungen mit Bezug zur Messung	9
6 Modellkorrelierte Randbedingungen der Simulation	10
7 Grundlegende Modelle	11
7.1 Allgemeines	11
7.2 Volumenmaterial (Fall 1 der Anwendung)	11
7.3 Transparente Einzelschicht (Fall 2 der Anwendung)	11
7.4 Semi-transparente Einzelschicht (Fall 3 der Anwendung)	11
7.5 Mehrschichten und periodische Schichten (Fall 4 der Anwendung)	12
7.6 Effektive Materialien (Fall 5 der Anwendung)	12
8 Rohdaten	12
9 Überprüfung des Geräts auf korrekte Justierung	12
9.1 Straight-Line-Messung	12
9.2 Einfache Messung von Winkeln	12
9.2.1 Messung an einer bekannten Probe, z. B. SiO ₂ /Si, mit Fitanpassung des Einfallswinkels	12
9.2.2 Messung des Brewster-Winkels von Wasser, eines Lösungsmittels oder eines technischen Glases	14
10 Überprüfung des Geräts auf korrekte Kalibrierung	15
11 Prüfbericht	15
Anhang A (informativ) Mathematische und physikalische Grundlagen der Ellipsometrie	16
A.1 Optische Kenngrößen	16
A.2 Optische Materialkonstanten und Funktion	16
A.3 Dielektrische Konstanten und Funktion	16
A.4 Zusammenhang zwischen komplexem Brechungsindex N und dielektrischer Funktion ϵ	17
A.5 Definition der pseudo-dielektrischen Funktion	17
A.6 Grenzflächenkenngrößen	17
A.7 Gütefunktion zwischen Modell basiert simulierten (mod.) und experimentell bestimmten (exp.) ellipsometrischen Transfergrößen	18
A.8 Jones-Vektoren und Jones-Matrizen	18
A.9 Stokes-Vektoren und Müller-Matrizen	19
Literaturhinweise	21

Bilder

Bild 1 — Prinzipdarstellung des optischen Lichtweges/des Polarisationszustandes vor und nach der Reflexion (Substratoberfläche, Einfallslot und -winkel, Lichtweg/-welle, s- und p-Polarisation)	8
Bild 2 — Prinzipdarstellung des messtechnischen Aufbaus (Lichtquelle, P-C-S-A-Konfiguration)	9
Bild 3 — Prinzipdarstellung der iterativen Fit-Prozedur	11
Bild 4 — Messung an einem bekannten Referenzmaterial und dejustierten Einfallswinkeln	13
Bild 5 — Fit auf die (dejustierten) Einfallswinkel der Messung aus Bild 4	14

Tabellen

Tabelle 1 — Symbole und Abkürzungen	7
---	---

Europäisches Vorwort

Der Text von ISO 23131:2021 wurde vom Technischen Komitee ISO/TC 107 „Metallic and other inorganic coatings“ der Internationalen Organisation für Normung (ISO) erarbeitet und vom Technischen Komitee CEN/TC 262 „Metallische und andere anorganische Überzüge, einschließlich des Korrosionsschutzes und der Korrosionsprüfung von Metallen und Legierungen“ als prEN ISO 23131:2022 übernommen, dessen Sekretariat von BSI gehalten wird.

Dieses Dokument ist derzeit zur CEN-Umfrage vorgelegt.

Rückmeldungen oder Fragen zu diesem Dokument sollten an das jeweilige nationale Normungs-institut des Anwenders gerichtet werden. Eine vollständige Liste dieser Institute ist auf den Internetseiten von CEN abrufbar.

Anerkennungsnotiz

Der Text von ISO 23131:2021 wurde von CEN als prEN ISO 23131:2022 ohne irgendeine Abänderung genehmigt.

Vorwort

ISO (die Internationale Organisation für Normung) ist eine weltweite Vereinigung nationaler Normungsinstitute (ISO-Mitgliedsorganisationen). Die Erstellung von Internationalen Normen wird üblicherweise von Technischen Komitees von ISO durchgeführt. Jede Mitgliedsorganisation, die Interesse an einem Thema hat, für welches ein Technisches Komitee gegründet wurde, hat das Recht, in diesem Komitee vertreten zu sein. Internationale staatliche und nichtstaatliche Organisationen, die in engem Kontakt mit ISO stehen, nehmen ebenfalls an der Arbeit teil. ISO arbeitet bei allen elektrotechnischen Normungsthemen eng mit der Internationalen Elektrotechnischen Kommission (IEC) zusammen.

Die Verfahren, die bei der Entwicklung dieses Dokuments angewendet wurden und die für die weitere Pflege vorgesehen sind, werden in den ISO/IEC-Direktiven, Teil 1 beschrieben. Es sollten insbesondere die unterschiedlichen Annahmekriterien für die verschiedenen ISO-Dokumentenarten beachtet werden. Dieses Dokument wurde in Übereinstimmung mit den Gestaltungsregeln der ISO/IEC-Direktiven, Teil 2 erarbeitet (siehe www.iso.org/directives).

Es wird auf die Möglichkeit hingewiesen, dass einige Elemente dieses Dokuments Patentrechte berühren können. ISO ist nicht dafür verantwortlich, einige oder alle diesbezüglichen Patentrechte zu identifizieren. Details zu allen während der Entwicklung des Dokuments identifizierten Patentrechten finden sich in der Einleitung und/oder in der ISO-Liste der erhaltenen Patenterklärungen (siehe www.iso.org/patents).

Jeder in diesem Dokument verwendete Handelsname dient nur zur Unterrichtung der Anwender und bedeutet keine Anerkennung.

Für eine Erläuterung des freiwilligen Charakters von Normen, der Bedeutung ISO-spezifischer Begriffe und Ausdrücke in Bezug auf Konformitätsbewertungen sowie Informationen darüber, wie ISO die Grundsätze der Welthandelsorganisation (WTO, en: World Trade Organization) hinsichtlich technischer Handelshemmnisse (TBT, en: Technical Barriers to Trade) berücksichtigt, siehe www.iso.org/iso/foreword.html.

Dieses Dokument wurde vom Technischen Komitee ISO/TC 107, *Metallic and other inorganic coatings*, erarbeitet.

Rückmeldungen oder Fragen zu diesem Dokument sollten an das jeweilige nationale Normungsinstitut des Anwenders gerichtet werden. Eine vollständige Auflistung dieser Institute ist unter www.iso.org/members.html zu finden.

Einleitung

Bei dem Messverfahren Ellipsometrie handelt es sich um ein phasenempfindliches Reflexionsexperiment mit polarisiertem Licht im optischen Fernfeld. Die Ellipsometrie ist als nicht invasives Messverfahren seit langem in der Halbleitertechnik – speziell in der integrierten Fertigung – zunächst als Ein-Wellenlängen, dann als Mehrwellen-, später als spektroskopisches Messverfahren etabliert.

Mittels Ellipsometrie können optische bzw. dielektrische Konstanten beliebiger Materialien sowie Schichtdicken wenigstens semi-transparenter Schichten bzw. Schichtsysteme bestimmt werden. Die Ellipsometrie ist ein indirektes Messverfahren, dessen Auswertung auf einer Modelloptimierung basiert. Die je nach Verfahrensprinzip unterschiedlichen Messgrößen werden in die ellipsometrischen Transfergrößen Ψ (Psi, Amplitudeninformation) und Δ (Delta, Phaseninformation) umgewandelt, aus denen die interessierenden physikalischen Zielgrößen (optische bzw. dielektrische Konstanten, Schichtdicken) dann über einen parametrisierten Fit bestimmt werden.

Die Ellipsometrie weist eine hohe Präzision in den ellipsometrischen Transfergrößen Ψ und Δ auf, die für ideale Schicht-Substrat-Systeme einer Schichtdickenempfindlichkeit von 0,1 nm entsprechen kann. Das Messverfahren kann somit geringste Abweichungen in den Oberflächeneigenschaften nachweisen. Das steht im engen Zusammenhang mit der Homogenität und der Isotropie der Materialoberfläche. Für das Erreichen der hohen Präzision ist bei inhomogenen Materialien das Messen am identischen Messort Grundvoraussetzung. Gleiches gilt für die Orientierung der Einfallsebene relativ zur Materialoberfläche für anisotrope Materialien.

Die absolute Genauigkeit, z. B. von Schichtdickenwerten, hängt im Wesentlichen von der Qualität des gewählten Modells zur Beschreibung der Materialoberfläche ab. Für ideale Schicht-Substrat-Systeme, wie zum Beispiel SiO₂ (ideal transparente Schicht) auf einem Si-Wafer (nahezu atomar glatte Substratoberfläche mit homogenen und isotropen Materialeigenschaften) kann die Genauigkeit der Schichtdicke durchaus die Werte der Präzision erreichen, weil das Modell die Realität des Schicht-Substrat-Systems in idealer Weise beschreibt. Für inhomogene, anisotrope, verschmutzte, mehrkomponentige, geschädigte, imperfekte oder raue Oberflächen bzw. Schichten kann die Genauigkeit der Schichtdickenbestimmung deutlich schlechter sein und ist generell von der Güte des gewählten Modells abhängig.

Trotz dieser Einschränkung ist die Ellipsometrie ein leistungsfähiges Verfahren, das entweder Material-Fingerprints (ohne Modellierung) ermöglicht oder modellbasiert die Bestimmung von optischen und dielektrischen Konstanten (auf bis zu 0,001 genau) bzw. Schichtdicken (auf bis zu 0,1 nm genau) in einem weiten Schichtdickenbereich von etwa 0,1 nm bis zu etwa 10 µm (in speziellen Fällen bis über 100 µm) erlaubt.

1 Anwendungsbereich

Dieses Dokument legt ein Verfahren zur Bestimmung optischer und dielektrischer Konstanten im UV-Vis-NIR-Spektralbereich sowie von Schichtdicken im Bereich der at-line-Fertigungskontrolle, der Qualitätssicherung, der Materialentwicklung, akkreditierter Prüflaboratorien.

Es ist anwendbar für stand-alone-Messsysteme. Die Präsentation der Ergebnisunsicherheit ist konform mit ISO/IEC Guide 98-3.

2 Normative Verweisungen

Die folgenden Dokumente werden im Text in solcher Weise in Bezug genommen, dass einige Teile davon oder ihr gesamter Inhalt Anforderungen des vorliegenden Dokuments darstellen. Bei datierten Verweisungen gilt nur die in Bezug genommene Ausgabe. Bei undatierten Verweisungen gilt die letzte Ausgabe des in Bezug genommenen Dokuments (einschließlich aller Änderungen).

ISO/IEC Guide 98-3, *Uncertainty of measurement — Part 3: Guide to the expression of uncertainty in measurement (GUM: 1995)*

3 Begriffe, Symbole und Abkürzungen

3.1 Begriffe

In diesem Dokument werden keine Begriffe aufgeführt.

ISO und IEC stellen terminologische Datenbanken für die Verwendung in der Normung unter den folgenden Adressen bereit:

- ISO Online Browsing Platform: verfügbar unter <https://www.iso.org/obp>
- IEC Electropedia: verfügbar unter <https://www.electropedia.org/>

3.2 Symbole und Abkürzungen

In Tabelle 1 werden die in dieser Norm verwendeten Symbole und Abkürzungen dargestellt.

Tabelle 1 — Symbole und Abkürzungen

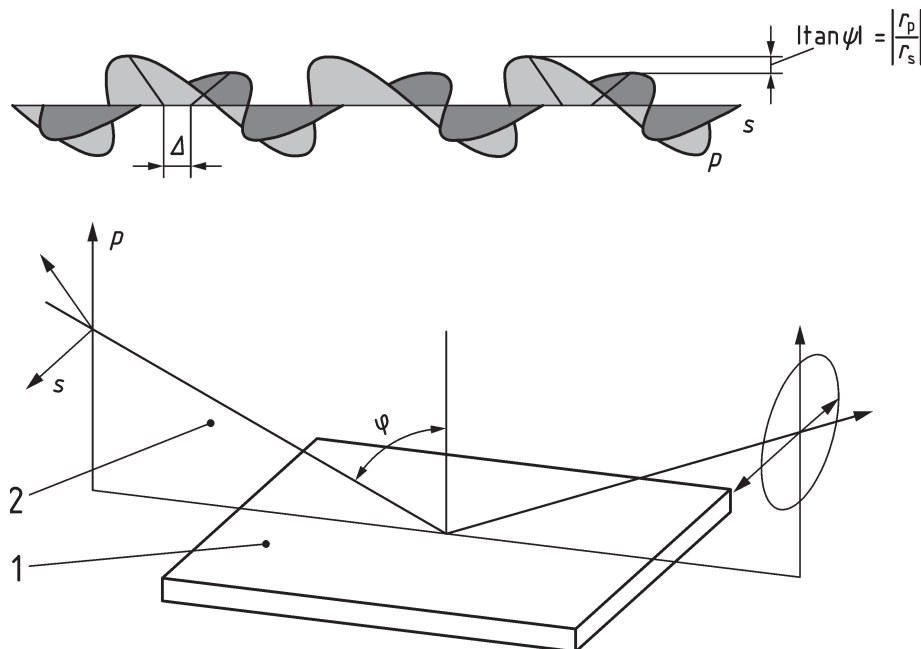
Symbol und Abkürzung	Erläuterung
P	Polarisator (en: polarizer)
C	Kompensator (en: compensator)
S	Probe (en: sample)
A	Analysator (en: analyzer)
POI	Einfallsebene (en: plane of incidence) des einfallenden Lichts, gebildet durch Einfallslot und Ausbreitungsrichtung des einfallenden Lichtes
POP	Polarisationsebene (en: plane of polarization) des einfallenden Lichts, gebildet durch den elektrischen Feldvektor und die Ausbreitungsrichtung des einfallenden Lichtes
Ψ, Δ	Ellipsometrische Transfergrößen Psi und Delta, die z. B. nach ISO/IEC 17025 als zu archivierende Rohdaten fungieren.

Tabelle 1 (fortgesetzt)

Symbol und Abkürzung	Erläuterung
φ	Einfallswinkel (en: angle of incidence) des einfallenden Lichts zwischen Einfallslot und der Ausbreitungsrichtung des einfallenden Lichtes
d	Schichtdicke

4 Experimentelle Randbedingungen mit Bezug zur Probe

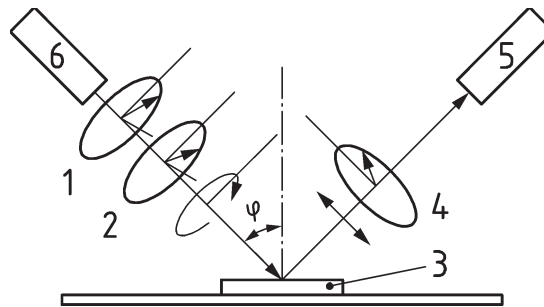
Bild 1 und Bild 2 zeigen die Prinzipdarstellungen einer ellipsometrischen Messung als phasenempfindliches Reflexionsexperiment mit polarisiertem Licht, zum einen unter lichtoptischen (siehe Bild 1), zum anderen unter messtechnischen Gesichtspunkten (siehe Bild 2).



Legende

- 1 Probe
- 2 POI
- φ Einfallswinkel

Bild 1 — Prinzipdarstellung des optischen Lichtweges/des Polarisationszustandes vor und nach der Reflexion (Substratoberfläche, Einfallslot und -winkel, Lichtweg/-welle, s- und p-Polarisation)



Legende

- 1 Polarisator
- 2 Kompensator
- 3 Probe
- 4 Analysator
- 5 Detektor
- 6 Lichtquelle

Bild 2 — Prinzipdarstellung des messtechnischen Aufbaus (Lichtquelle, P-C-S-A-Konfiguration)

Folgende experimentelle Randbedingungen mit Bezug zur Probe sollten vorab abgeklärt und bei Relevanz im Prüfbericht festgehalten werden:

- Messort (Bewertung der Homogenität) und Probenorientierung (Bewertung der Isotropie) festlegen/bezeichnen;
- Oberflächenbeschaffenheit, ggf. mikroskopische Aufnahme der Oberfläche;
- Oberflächentopographie, ggf. Rauheit der Oberfläche messen;
- weitere Probeneigenschaften, die zu berücksichtigen oder zu korrigieren sind:
- gewölbte und keilförmige Proben;
 - Einfluss eines ggf. vorhandenen Rückseitenreflexes (bei transparenten Substraten);
 - Oberfläche wie angeliefert oder gereinigt;
 - Fixierung der Probe.

5 Experimentelle Randbedingungen mit Bezug zur Messung

Folgende experimentelle Randbedingungen mit Bezug zur Messung sollten vorab abgeklärt und bei Relevanz im Prüfbericht festgehalten werden:

- Angabe, ob es sich um ein abbildendes Ellipsometer (en: imaging ellipsometer) oder nicht-abbildendes Ellipsometer (en: mapping ellipsometer, manuell oder automatisch) handelt;
- Für abbildende Ellipsometer sind folgende Größen von Relevanz: resultierende Größe des Messfeldes/ des Integrationsgebiets (FOI [en: field of illumination: Probenfläche, die vom einfallenden Licht beleuchtet wird], FOV [en: field of view: Probenfläche innerhalb des FOI, aus dem das in den Detektor fallende Licht stammt], ROI [en: region of interest: Probenfläche innerhalb des FOV, das für die Messung von Relevanz ist]);

- Für nicht-abbildende Ellipsometer sind folgende Größen von Relevanz: resultierende Größe des Messfeldes/des Integrationsgebietes (FOI, FOA [en: field of analysis: Probenfläche innerhalb des FOI, aus dem das in den Detektor fallende Licht stammt]);
- Ellipsometer-Konfigurationen: [P-S-A, P-C-S-A, P-S-C-A oder P-C-S-C-A];
- Ellipsometer-Prinzip (RAE [en: rotating analyser ellipsometer], RPE [en: rotating polarizer ellipsometer], PME [en: phase modulated ellipsometer], RCE [en: rotating compensator ellipsometer], NE [en: nulling ellipsometer], SSE [en: step scan ellipsometer], RSE [en: referenced spectral ellipsometer], ...);
- Ellipsometrie-Klasse (SWE [en: single wavelength ellipsometry], MWE [en: multiple wavelength ellipsometry], SE [en: spectroscopic ellipsometry]);
- verwendeter Spektralbereich und resultierende spektrale Auflösung, insbesondere abhängig von der verwendeten Lichtquelle und des verwendeten Spektrometers;
- Einfallswinkel, Mehrwinkelmessung zur Überprüfung des Modells, vorzugsweise/mindestens bei zwei wesentlich voneinander verschiedenen Einfallswinkeln;
- Orientierung der Probe auf dem Probentisch;
- Position des FOV bzw. des FOA auf der Probe;
- Ausrichtung der Probe (en: alignment of the sample) relativ zur Einfallsebene (POI [en: plane of incidence]) und/oder relativ zur Polarisationssebene (POP [en: plane of polarization]).

6 Modellkorrelierte Randbedingungen der Simulation

Folgende Randbedingungen mit Bezug zur Simulation müssen vorab abgeklärt und bei Relevanz im Prüfbericht festgehalten werden:

- Definition des ellipsometrischen Modells (Substratmaterial, Rauheit, Schichtarchitektur, Schichtmaterialien, Startschichtdicken und Fit-Parameter);
- Verwendung von Datenbankwerten für optische bzw. dielektrische Konstanten oder separate experimentelle Bestimmung dieser Konstanten für Nicht-Fit-Parameter;
- verwendete Dispersionsformeln.

Die Bedingung, dass die mittlere quadratische Abweichung (D_{RMS} [en: root-mean-square]) zwischen gemessenen und simulierten Ψ – bzw. Δ –Kurvenverläufen nach Gleichung (A.20) minimal wird, liefert dann im Ergebnis einer iterativen Fit-Prozedur (siehe Bild 3) die gewünschten Fit-Parameter, wie z. B. die Schichtdicke und den Brechungsindex.

ANMERKUNG Der Begriff „Fehler“, (en: error), wird nach ISO/IEC Guide 98-3 nicht mehr verwendet. Dennoch findet sich insbesondere der Begriff „mittlerer quadratischer Fehler“ (RMSE, en: root mean square error), anstatt D_{RMS} , noch in vielen Softwareprodukten.